

# Лекция 9

Структура ошибки выпуклых комбинаций,  
комитетные методы, логическая коррекция

*Лектор – Сенько Олег Валентинович*

Курс «Математические основы теории прогнозирования»  
4-й курс, III поток

- 1 Впуклые комбинации алгоритмов
- 2 Комитетные методы
- 3 Наивный байесовский корректор
- 4 Логическая коррекция
- 5 Алгебраическая коррекция

Использование различных методов прогнозирования (распознавания), а также различных обучающих выборок или подмножеств признаков позволяет получить набор прогнозирующих (распознающих) алгоритмов:  $A_1, \dots, A_r$ . Можно попытаться увеличить обобщающую способность за счёт выбора алгоритма с минимальной оценкой ошибки прогнозирования. Однако нередко более эффективной процедурой является вычисление прогноза с использованием всех алгоритмов из  $A_1, \dots, A_r$ . Использование коллектива (ансамбля) алгоритмов, которые строятся с помощью различных методов позволяет использовать при прогнозировании различные принципы экстраполяции, лежащих в основе этих методов. Статистическое обоснование использованию ансамбля алгоритмов даёт анализ ошибки выпуклой комбинации прогнозов, вычисляемых членами ансамбля. Предположим, что алгоритмы ансамбля  $A_1, \dots, A_r$  вычисляют прогноз переменной  $Y$ .

Пусть  $f_i$  - прогноз, вычисляемый алгоритмом  $A_i$ . Тогда

$$\Delta_i = E_{\Omega}(Y - f_i)^2$$

является математическим ожиданием квадрата ошибки прогнозирования для  $A_i$ . Введём обозначение  $\rho_{i'i''}$  для математического ожидания квадрата отклонения друг от друга прогнозов, вычисляемых алгоритмами  $A_{i'}$  и  $A_{i''}$ . То есть

$$\rho_{i'i''} = E_{\Omega}(f_{i'} - f_{i''})^2.$$

Пусть  $c_1, \dots, c_r$  - положительные коэффициенты такие, что  $\sum_{i=1}^r c_i = 1$ . Обозначим через  $\hat{f}$  **выпуклую комбинацию** прогнозов, вычисляемых алгоритмами ансамбля  $A_1, \dots, A_r$ . То есть

$$\hat{f} = \sum_{i=1}^r c_i f_i.$$

Для ошибки выпуклой комбинации справедливо выражение

$$\hat{\Delta} = E_{\Omega}(Y - \hat{f})^2 = \sum_{i=1}^r c_i \Delta_i - \frac{1}{2} \sum_{i'=1}^r \sum_{i''=1}^r c_{i'} c_{i''} \rho_{i' i''} \quad (1)$$

Принимая во внимание, что все квадратичные отклонения  $\rho_{i' i''}$  всегда неотрицательны, а коэффициенты  $c_1, \dots, c_r$  положительны получаем неравенство

$$\hat{\Delta} \leq \sum_{i=1}^r c_i \Delta_i.$$

Иными словами математическое ожидание квадрата ошибки выпуклой комбинации всегда не превышает аналогичную выпуклую комбинацию математических ожиданий квадратов ошибок отдельных алгоритмов ансамбля.

Рассмотрим, случай, когда все алгоритмы участвуют в построении коллективного решения равноправно. В этом случае  $c_i = \frac{1}{r}$ ,  $i = 1, \dots, r$ . Выпуклая комбинация становится просто средним значением

$$\hat{f} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^r f_i.$$

Математическое ожидание квадрата ошибки усреднённого по ансамблю прогноза вычисляется по формуле

$$\hat{\Delta} = E_{\Omega}(Y - \hat{f})^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^r \Delta_i - \frac{1}{2} \frac{1}{m^2} \sum_{i'=1}^r \sum_{i''=1}^r c_{i'} c_{i''} \rho_{i' i''} \quad (2)$$

Таким образом математическое ожидание квадрата ошибки усреднённого по ансамблю прогноза представляет собой разницу между средней по ансамблю величиной математического ожидания квадрата ошибки и средней величиной квадратичного отклонения между прогнозами вычисляемыми различными алгоритмами.

Рассмотрим сначала несколько простейших эвристических методов принятия коллективных решений. Предположим, что у нас есть ансамбль алгоритмов распознавания  $A_1, \dots, A_r$ , которые были использованы для классификации некоторого объекта  $s^*$ .

**Голосование по большинству.** Простейшим комитетным методом является метод голосования по большинству, относящий объект к тому классу, к которому он был присвоен относительным большинством алгоритмов.

**Использование вещественных оценок за классы.** Напомним, что произвольный распознающий алгоритм является комбинацией распознающего оператора, вычисляющего оценки за классы и решающего правила, производящего классификацию по оценкам, вычисленным распознающим оператором. Предположим, что  $\Gamma_l^i(*)$  - оценка за класс  $l$ , вычисляемая алгоритмом  $A_i$ . Коллективное решение может строиться путём вычисления коллективных оценок за классы через оценки  $\Gamma_l^i(*)$ , соответствующие отдельным алгоритмам. При этом могут использоваться различные варианты вычисления

1) Коллективная оценка за класс  $K_l$  вычисляется как среднеарифметическое оценок, вычисляемых алгоритмами из ансамбля  $\{A_1, \dots, A_r\}$ :

$$\Gamma_l^{av}(s^*) = \sum_{j=1}^r \Gamma_l^j(s^*).$$

2) Коллективная оценка за класс  $K_l$  вычисляется как вычисляется как минимум всех оценок за данный класс полученных алгоритмами из ансамбля  $\{A_1, \dots, A_r\}$ :

$$\Gamma_l^{min}(s^*) = \min_{j \in \{1, \dots, r\}} \Gamma_l^j(s^*).$$



3) Коллективная оценка за класс  $K_l$  вычисляется как вычисляется как максимум всех оценок за данный класс полученных алгоритмами из ансамбля  $\{A_1, \dots, A_r\}$ :

$$\Gamma_l^{min}(s^*) = \max_{j \in \{1, \dots, r\}} \Gamma_l^j(s^*).$$

4) Еще одним употребительным способом построения комитетного решения является использование произведений оценок, вычисляемых алгоритмами из ансамбля  $\{A_1, \dots, A_r\}$ :

$$\Gamma_l^{av}(s^*) = \prod_{j=1}^r \Gamma_l^j(s^*).$$

К достоинствам комитетных методов относится их простота, высокая быстродействие. Для применения этих методов не требуется никакой дополнительной процедуры обучения, что позволяет сразу переходить к распознаванию объектов комитетом обученных алгоритмов.

Подобными же достоинствами обладает другой известный метод построения коллективных решений – «Наивный байесовский классификатор», который является статистическим методом, основанном на оценках вероятностей принадлежности объекта классам в зависимости от результатов классификации отдельными алгоритмами. Предположим, что алгоритмы  $\{A_1, \dots, A_r\}$  отнесли объект  $s^*$  в классы  $K_{J(1)}, \dots, K_{J(r)}$  соответственно. Факт отнесения объекта  $s$  в класс  $K_i$  алгоритмом  $A_j$  далее будем обозначать  $A_j(s) = \text{Pt}_i(s)$ , где  $\text{Pt}_i(s)$  является предикатом, обозначающим отнесение  $s$  в класс  $K_i$ . Наибольшую точность распознавания обеспечивает байесовский классификатор, относящий объект в класс  $K_{i^*}$ , для которого максимальной является условная вероятность

$$P[s^* \in K_{i^*} \mid A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*), \dots, A_r(s^*) = \text{Pt}_{J(r)}(s^*)] \quad (3)$$

Условная вероятность (1) для класса  $K_i$  может быть вычислена по формуле Байеса

$$\begin{aligned} & P[s^* \in K_i \mid A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*), \dots, A_r(s^*) = \text{Pt}_{J(r)}(s^*)] = \\ &= \frac{P(K_i)P[A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*), \dots, A_r(s^*) = \text{Pt}_{J(r)}(s^*) \mid s^* \in K_i]}{P[A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*), \dots, A_r(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*)]}. \end{aligned}$$

Условная вероятность

$$P[A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*), \dots, A_r(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*) \mid s^* \in K_i]$$

может быть оценена исходя из гипотезы о независимости входящих в ансамбль классификаторов. То есть

$$\begin{aligned} & P[A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*), \dots, A_r(s^*) = \text{Pt}_{J(r)}(s^*) \mid s^* \in K_i] = \\ &= \prod_{j=1}^r P[A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(j)}(s^*) \mid s^* \in K_i]. \end{aligned}$$

В качестве оценок вероятностей

$$P(K_1), \dots, P(K_l)$$

$$P[A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(j)}(s^*) \mid s^* \in K_i],$$

при

$$j = 1, \dots, r, i = 1, \dots, r$$

могут быть использованы соответствующие доли объектов обучающей выборки. Отметим, что вероятность

$$P[A_1(s^*) = \text{Pt}_{J(1)}(s^*), \dots, A_r(s^*) = \text{Pt}_{J(r)}(s^*)]$$

является одинаковым для всех классов множителей, который может не учитываться при вычислении окончательного решения.

Комитетные методы и наивный байесовский классификатор являются простейшими методами коллективной коррекции, не учитывающих взаимодействие алгоритмов ансамбля или их относительную эффективность. Требование повышения обобщающей способности ансамбля за счёт более полного учёта его структуры и использования возможностей лежащих в его основе эвристик привело к созданию средств алгебраической и логической коррекции. Методы логической коррекции учитывают только окончательные результаты классификации. Пусть у нас имеется некоторая выборка  $\tilde{S}_c = \{s_1, \dots, s_q\}$  объектов, принадлежащих классам  $K_1, \dots, K_L$ , по которой мы собираемся произвести коррекцию. Данной выборке может быть сопоставлена информационная матрица  $\|\alpha_{li}\|_{L \times q}$ , где  $\alpha_{li} = 1$  при  $s_i \in K_l$  и  $\alpha_{ij} = 0$  в противном случае.

Выборке  $\tilde{S}_c$  может быть также сопоставлен набор матриц

$$\{\|\beta_{li}^j\|_{L \times q} \mid j = 1, \dots, r\}.$$

Элемент  $\beta_{li}^j = 1$ , если  $A_j(s_i) = \text{Pt}_l(s_i)$ , и  $\beta_{li}^j = 0$  в противном случае. Поиск оптимального логического корректора сводится к поиску для каждого класса такой логической функции  $F_l(z_1, \dots, z_r)$  от булевых переменных  $z_1, \dots, z_r$ , чтобы равенство

$$F_l[\beta_{li}^{g(1)}, \dots, \beta_{li}^{g(r)}] = \alpha_{li}$$

выполнялось для возможно большего числа объектов выборки  $\tilde{S}_c$ . Функция  $g(i)$  устанавливает связь между переменными  $z_1, \dots, z_r$  и алгоритмами  $A_1, \dots, A_r$ . Использование  $g$  позволяет учитывать информативность алгоритмов для оценки принадлежности распознаваемых объектов классу  $K_l$ , через их место в логической функции.

Предположим, что отсутствуют противоречия типа существования в выборке  $\tilde{S}_c$  объектов  $s_{i'}$  и  $s_{i''}$  с неодинаковыми  $\alpha_{li'}$  и  $\alpha_{li''}$ , которые однако одинаково классифицируются алгоритмами ансамбля. То есть  $\beta_{li'}^j = \beta_{li''}^j$  при  $j = 1, \dots, r$ .

В случае, если задана какая-либо функция  $g$ , а множество векторов

$$\{(\beta_{li}^1, \dots, \beta_{li}^r) \mid i = 1, \dots, r\}$$

включает всё множество вершин единичного куба  $\mathbb{E}^r$ , логическая функция  $F_l$  оказывается полностью определённой. В противном случае задача построения логического корректора включает в себя задачу доопределения логической функции естественным путём заданной на выборке  $\tilde{S}_c$  на весь единичный куб  $\mathbb{E}^r$ .

Одним из способов логической коррекции является построение монотонных корректоров, которое сводится к поиску такой функции  $g$ , что логическая функция  $F_l$ , правильно вычисляющая элементы информационной матрицы, является монотонной. То есть ищется функция  $g(i)$ , которая а) удовлетворяет равенству

$$F_l[\beta_{li}^{g(1)}, \dots, \beta_{li}^{g(r)}] = \alpha_{li}$$

при  $i = 1, \dots, q$ ;

б) для любых векторов  $(z'_1, \dots, z'_r)$  и  $(z''_1, \dots, z''_r)$ , удовлетворяющих условию

$$(z'_1, \dots, z'_r) \succeq (z''_1, \dots, z''_r)$$

выполняется неравенство

$$F_l(z'_1, \dots, z'_r) \succeq F_l(z''_1, \dots, z''_r)$$



Построение монотонных корректоров сводится к следующей схеме. В исходном наборе  $A_1, \dots, A_r$  для каждого класса  $K_l$  выбирается поднабор  $A_{f(1)}, \dots, A_{f(k)}$ . Объект  $s$  относится монотонным логическим корректором в класс  $K_l$  в том и только в том случае, если он отнесён в  $K_l$  всеми алгоритмами из  $A_{f(1)}, \dots, A_{f(k)}$  и ещё одним алгоритмом из набора  $A_1, \dots, A_r$ , который не принадлежит  $A_{f(1)}, \dots, A_{f(k)}$ .

Универсальным способом построения оптимального распознающего алгоритма по набору исходных алгоритмов  $A_1, \dots, A_r$  является использование алгебраических методов коррекции. В отличие от логических методов коррекции алгебраические методы используют не только окончательные результаты классификации, содержащиеся в матрицах  $\|\beta_{li}^j\|_{L \times q}$ , но также матрицы оценок  $\|\gamma_{li}^j\|_{L \times q}$ , вычисляемые операторами  $R_1, \dots, R_k$ , входящими в алгоритмы  $A_1, \dots, A_r$ . Элемент  $\gamma_{li}^j$  является оценкой объекта  $s_i$  за класс  $K_l$ , вычисляемая оператором  $R_j$ ,  $i = 1, \dots, q, l = 1, \dots, L, j = 1, \dots, r$ . Основы теории алгебраической коррекции были разработаны Ю.И.Журавлёвым в 1976-1978 годах. Задача распознавания в алгебраической теории рассматривается как задача построения по начальной информации  $I$  о классах  $K_1, \dots, K_L$  для предъявленной для распознавания выборки  $\tilde{S}_c = \{s_1, \dots, s_q\}$  правильной информационной матрицы  $\|\alpha_{li}^j\|_{L \times q}$ .

Последнюю задачу мы будем называть задачей  $\mathbb{Z}(I, \tilde{S}_c, Pt_1, \dots, Pt_L)$  или просто задачей  $\mathbb{Z}$ . Примером начальной информации о классах является таблица признаков описаний эталонных объектов классов и их информационная матрица. Предположим, что у нас имеется множество алгоритмов  $\{A\}$ , переводящих пару  $(I, \tilde{S}_c)$  в матрицы  $\|\beta_{li}^j\|_{L \times q}$ , составленные из элементов  $\{0, 1, \Delta\}$ , где значения 1 и 0 как и раньше соответствуют истинности или ложности предикатов, вычисленными алгоритмами из множества  $\{A\}$ , значение  $\Delta$  соответствует отказу от вычисления значения предиката.

**Определение 1.** Алгоритм  $A$  называется корректным для задачи  $\mathbb{Z}$ , если выполнено равенство

$$A(I, \tilde{S}_c, Pt_1, \dots, Pt_L) = \|\alpha_{li}\|_{L \times q}.$$

Алгоритм, не являющийся корректным для задачи  $\mathbb{Z}$ , называется некорректным.

Совокупность  $\{A\}$  состоит из вообще говоря некорректных алгоритмов. Алгебраический подход к решению задач распознавания включает в себя введение алгебраических операций над алгоритмами из  $\{A\}$ , позволяющих строить корректные алгоритмы по наборам алгоритмов из  $\{A\}$ . Поскольку каждый распознающий алгоритм может быть представлен как последовательное выполнение распознающего оператора и решающего правила, множеству  $\{A\}$  соответствуют множества операторов  $\{R\}$  и множество решающих правил  $\{C\}$ . Каждый из операторов из множества  $\{R\}$  вычисляет для задачи  $\mathbb{Z}$  матрицу оценок за классы

$$R^*(I, \tilde{S}_c) = \|\gamma_{li}^*\|_{L \times q}$$

На множестве операторов  $\{R\}$  вводятся операции сложения, умножения и умножения на скаляр.

Предположим, что  $R'$  и  $R''$  являются операторами из  $\{R\}$ . При этом  $R'(I, \tilde{S}_c) = \|\gamma'_{li}\|_{L \times q}$  и  $R''(I, \tilde{S}_c) = \|\gamma''_{li}\|_{L \times q}$ . Пусть  $b$  является некоторой скалярной величиной. Операция умножения на скаляр преобразует оператор  $R'$  в оператор  $(b \bullet R')$ , задаваемый формулой

$$(b \bullet R')(I, \tilde{S}_c) = \|b\gamma'_{li}\|_{L \times q}, \quad (4)$$

Сумма операторов  $(R' + R'')$  задаётся формулой

$$(R' + R'')(I, \tilde{S}_c) = \|\gamma'_{li} + \gamma''_{li}\|_{L \times q}, \quad (5)$$

Произведение операторов  $(R' \bullet R'')$  задаётся формулой

$$(R' \bullet R'')(I, \tilde{S}_c) = \|\gamma'_{li} \cdot \gamma''_{li}\|_{L \times q}, \quad (6)$$

Использование операций (4)-(6) позволяет строить новые распознающие операторы, являющиеся полиномами от операторов из исходного множества вида

$$\sum_{i=1}^{N_p} a_i [R_{t(1,i)} \bullet \dots \bullet R_{t(k(i),i)}]$$

Функция  $t(j, i)$  указывает на оператор, находящийся в позиции  $j$  слагаемом с номером  $i$ ,  $k_i$  - число сомножителей в слагаемом с номером  $i$ . Очевидно, что замыкание  $\mathbf{L}\{R\}$  множества операторов  $\{R\}$  относительно операций (4) и (5) является линейным векторным пространством. Обозначим через  $\mathbf{U}\{R\}$  алгебраическое замыкание множества  $\{R\}$  относительно операций (4)-(6).

Рассмотрим условия, существования корректного алгоритма для некоторой задачи  $\mathbb{Z}(I, \tilde{S}_c, Pt_1, \dots, Pt_L)$ .

. **Определение 2.** Если множество матриц  $\{R(I, \tilde{S}_c)\}$ , где операторы пробегает множество  $\{R\}$ , содержит базис в пространстве числовых матриц размерности  $L \times q$ , то задача  $\mathbb{Z}(I, \tilde{S}_c, Pt_1, \dots, Pt_L)$  называется полной относительно  $\{R\}$ .

**Определение 3.** Решающее правило  $C$  называется корректным, если для всякой выборки длины  $q$  существует хотя бы одна числовая матрица  $\|\gamma'_{li}\|_{L \times q}$  такая, что

$$C(\|\gamma'_{li}\|_{L \times q}) = \|\alpha_{li}\|_{L \times q}$$

Пусть  $\{A\}$  является множество алгоритмов вида  $A = R \otimes C^*$ , где  $R \in \{R\}$ ,  $C^*$  - некоторое корректное решающее правило.

**Определение 4.** Множества алгоритмов вида  $A = R \otimes C^*$ , будут обозначаться  $\mathbf{L}\{A\}$  и  $\mathbf{U}\{A\}$ , если  $R \in \mathbf{L}\{R\}$  и  $R \in \mathbf{U}\{R\}$  соответственно.

Пусть  $C^*$  - некоторое корректное решающее правило.

**Теорема 1.** Если множество  $\{Z\}$  состоит лишь из задач, полных относительно  $\{R\}$ , то линейное замыкание  $L\{A = R \otimes C^*\}$ , является корректным относительно  $\{Z\}$ .

**Доказательство.** Пусть  $M$  является матрицей, которая может быть переведена решающим правилом  $C^*$  в информационную матрицу  $\|\alpha_{li}\|_{L \times q}$ . Существование матрицы  $M$  следует из корректности решающего правила  $C^*$ . При фиксированном  $q$  базис в пространстве числовых матриц размерности  $L \times q$  состоит из  $Lq$  матриц  $M_1, \dots, M_{Lq}$ . Тогда существуют такие числа  $c_1, \dots, c_{Lq}$ , что 
$$M = \sum_{i=1}^{Lq} c_i M_i.$$



В том случае, если матрицы  $M_1, \dots, M_{Lq}$  построены из  $\{I, \tilde{S}_c\}$  с помощью операторов  $R_1, \dots, R_{Lq}$  из  $\{R\}$ , корректный алгоритм  $A_{corr}$  может быть представлен в виде

$$A_{corr} = \sum_{i=1}^{Lq} c_i R_i \otimes C^*$$

**Теорема доказана.**